

Prozessmodellierung in der Hochtemperaturverfahrenstechnik

J. Wendelstorf

Institut für Metallurgie*, Technische Universität Clausthal

1. Aachener Ofenbau- und Thermoprocess Kolloquium
Institut für Industrieofenbau und Wärmetechnik der RWTH Aachen
11.-12. Mai 2017

DOI: 10.21268/20170412-085933

Die digitale Transformation (Industrie 4.0) hat auch den Industrieofenbau und die Thermoprozesstechnik erfasst. Das Anlagenengineering erfordert zunehmend den Einsatz von CAE-Techniken, und die Automatisierungstechnik nutzt längst alle verfügbaren Informationstechnologien. Als Bindeglied zwischen Informationstechnologie, Anwendung und Wissenschaft lässt sich das in diesem Beitrag diskutierte Konzept der Prozessmodellierung betrachten. Moderne Softwaresysteme liefern die Werkzeuge zur effizienten Implementierung von Prozessmodellen. Universelle Softwarewerkzeuge zur Parametrierung und Validierung der Modelle lassen sich unabhängig vom konkreten Prozess erstellen. Die Wissenschaft stellt die notwendige mathematische Naturbeschreibung sowie Messungen von Stoffeigenschaften und Wechselwirkungen zwischen den Teilsystemen bereit. Das Prozessmodell liefert dem Anwender nun die informationstechnischen Abbildungen seiner Prozesse. Diese lassen sich zu Netzwerken verbinden, die dann wieder Prozessmodelle bilden (Flowsheet, Rekursion). An Beispielen wird kritisch diskutiert, wie sich Prozessmodelle definieren, parametrieren und validieren lassen. Inverse- oder Meta-Modelle liefern dann optimale Lösungen für die Probleme der Anwender. So ergibt sich ein Weg zur Vorausberechnung optimaler Anlagen, zu deren Betrieb unter ständig wechselnden Rahmenbedingungen und zur Bewertung gesellschaftlich relevanter Folgen durch den notwendigen Ressourceneinsatz.

*Institut für Metallurgie
Dr. rer.nat.habil. Jens Wendelstorf
Robert-Koch-Str. 42
D-38678 Clausthal-Zellerfeld
E-Mail: jens.wendelstorf@tu-clausthal.de

1 Einleitung

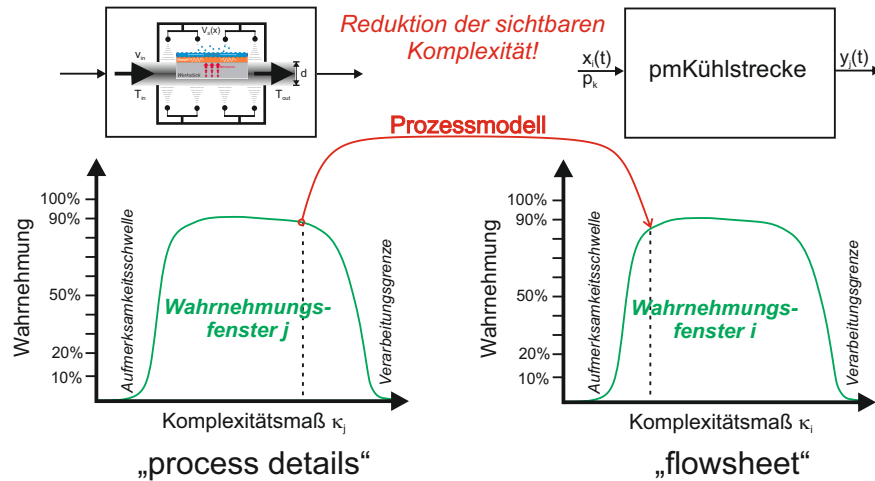


Abb. 1: Komplexitätsreduktion durch Prozessmodellierung.

So wie sich die klassische Naturwissenschaft mit der (kurzen) Beschreibung mehr oder weniger komplexer Phänomene durch einfache mathematische Zusammenhänge beschäftigt, so dient die Prozessmodellierung dieser *Komplexitätsreduktion* für den Fall realer Prozesse, die einer einfachen mathematischen Beschreibung nicht zugänglich sind. Wie in Abb. 1 skizziert, wird die Detailkomplexität des Prozesses durch das Modell verborgen. Dieser wird durch möglichst wenige Modelleingänge charakterisiert, aus denen das Prozessmodell die relevanten Informationen berechnet. Die Modellierung gehört auch bei Hochtemperaturprozessen unabdingbar zu deren wissenschaftlicher Untersuchung. Für die meisten praktisch relevanten Prozesse bestimmten bisher langwierige Experimente die Entwicklung, die Prozesse galten oft als nicht hinreichend vorausberechenbar. Diese Systemeigenschaft sollte nicht für eine wertende Kategorisierung verwendet werden (*high-tech* = erst berechnet, dann realisiert und *low-tech* = durch Probieren entstanden). Auch die zunächst nicht vorausberechenbaren (sich selbst organisierenden) Teile eines technischen Prozesses lassen sich mit Modellen beschreiben. Diese Modelle basieren auf Labormessungen und Betriebsdaten. Im Folgenden sollen einige Aspekte der in [1] dargestellten **Prozessmodellierung in der Hochtemperaturverfahrenstechnik** behandelt. Prozessmodelle ermöglichen modellbasierte Regler und cyber physische Systeme dar, die in der Automatisierung verfahrenstechnischer Prozesse eine wichtige Rolle spielen. Sie stellen ein Schlüsselement der digitalen Transformation (Industrie 4.0) dar, siehe [2]. Die Prozessmodellierung erscheint zudem als eine wichtige Entwicklungsebene der Modellierung an sich (siehe Abschnitt 5 und Abb. 10).

Die Grundlagen der Prozessmodellierung wurden u.a. von Kalman [3] und Aris [4] gelegt. Einführungen finden sich in [5, 6, 7, 1]. Steht für die jeweilige Aufgabenstellung keine fachspezifische

Softwareumgebung zur Verfügung oder soll ein offenes wissenschaftliches Prozessmodell effizient implementiert werden, so kann die Wolfram Language [8] verwendet werden. Der Begriff der Prozessmodellierung wird auch in den Wirtschaftswissenschaften verwendet [9], die hierzu wichtige Anregungen liefern können [10].

2 Prozessmodellierung: Was ist das?

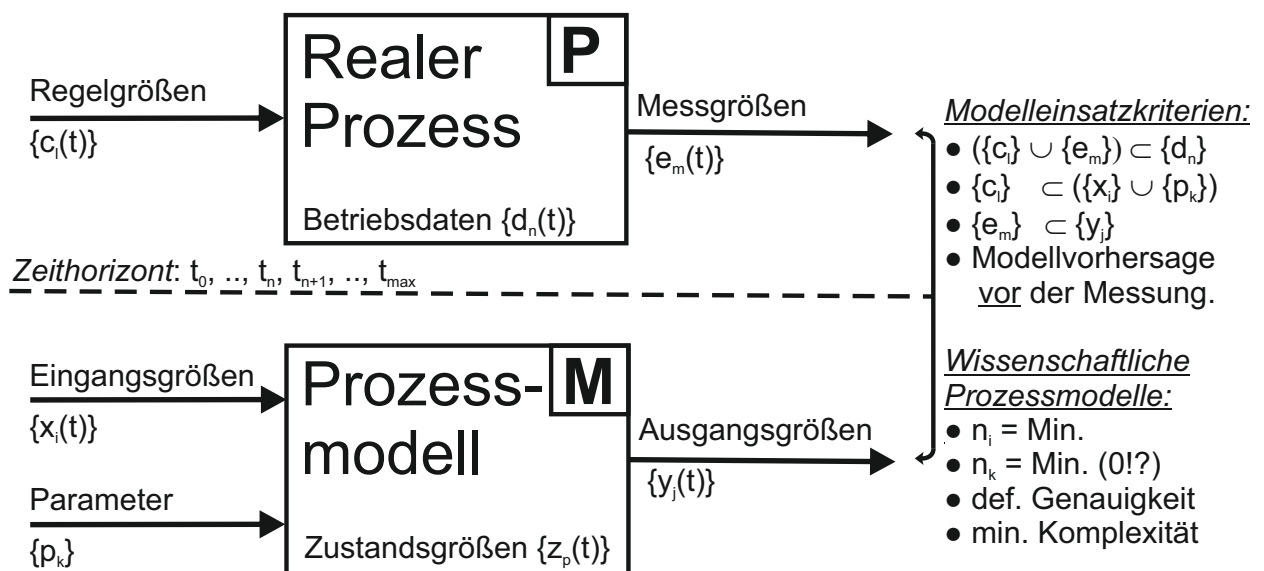


Abb. 2: Definition eines Prozessmodelles, auf der Basis von [11].

Prozessmodelle sind nicht Selbstzweck, sondern Arbeitsmittel. Was das äußere Erscheinungsbild, die Modellschnittstelle, betrifft, so sollte diese unabhängig vom Fachgebiet des modellierten Prozesses sein. Mit dieser Schnittstelle beschäftigt sich der folgende Abschnitt.

2.1 Modelldefinition

Als Prozessmodell wird ein Modell bezeichnet, welches das Verhalten eines dynamischen Vorgangs abbildet, ohne dass der Vorgang selbst durchgeführt wird. In der Definitionsphase werden die wesentlichen Eingangs- und Ausgangsgroessen des Prozesses festgelegt. Das vorhandene Wissen über den realen Prozess wird umgesetzt in eine formale Schnittstellendefinition, die – unabhängig von einem konkreten Modell – den Prozess charakterisiert und seine konkreten Ausprägungen experimentell und rechnerisch quantifizierbar macht (Abb. 2). Die Schnittstellen wissenschaftlicher Prozessmodelle sollten offen liegen.

Aus regelungstechnischer Sicht wird ein realer Prozess **P** über Regelgrößen $c_i(t)$ gesteuert und liefert Messgrößen $e_m(t)$. Aus verfahrenstechnischer Sicht wird ein Prozess über Bilanzgrenzen von seiner Umgebung abgegrenzt. Aus physikalischer Sicht ergeben sich oft zusätzliche Parameter, die zur Aufstellung von Stoff-, Impuls- und Energiebilanzen¹ erforderlich sind. Unter spezifizierten Zielvorgaben kann aus all diesen Ein- und Ausgangsgroessen eine Schnittstelle zu einem den Prozess **P** abbildenden Modell **M** definiert werden. Die zur Erreichung der jeweiligen Zielvorgaben notwendige Anzahl von Eingangsgrößen n_i und n_k ist ein wesentliches Qualitätsmerkmal des Prozessmodells

¹Weitere wichtige Bilanzen sind diejenigen der Entropie und der wirtschaftlichen Bewertung.

(Ockham's Rasiermesser). Hier bieten wissenschaftlich fundierte Modelle klare Vorteile gegenüber einer reinen Datenanalyse. Wie im Beispiel von Abschnitt 3 demonstriert wird, kann auf prozessspezifische Anpassungsparameter auch ganz verzichtet werden ($n_k = 0$).

Diese *Modellschnittstelle* ist, wie in Abb. 2 skizziert, eng mit der Definition der Parameter, Mess- und Steuergrößen des realen Prozesses verknüpft. Prozessmodelle werden in der Regel in Form von Software implementiert. Die dem Modell übergebenen Daten werden als Eingänge bezeichnet, die vom Modell gelieferten Daten als Ausgänge (Informationsfluss). Auf eine Beschränkung auf spezifische Datentypen sollte verzichtet werden. Die scharfe Abgrenzung des Prozessmodells als einer *black box*, die nur über die Eingänge $x_i(t)$, p_k und die Ausgänge $y_j(t)$ kommuniziert, hat folgende Vorteile:

- Es werden keine Annahmen über die Art des Modells gemacht.
- Die Definition der Eingänge $x_i(t)$ und p_k sowie der Ausgänge $y_j(t)$ kann vereinheitlicht werden, verschiedene Modelle können mit den gleichen Daten arbeiten.
- Verschiedene Modelle des gleichen Prozesses werden vergleichbar.
- Die Modelldetails einschließlich der Zustandsgrößen $z_p(t)$ werden auf der nächst höheren Beschreibungsebene nicht mehr benötigt.

Der reale Prozess wird durch die Regelgrößen $\{c_l(t)\}$ bestimmt und liefert die Messgrößen $\{e_m(t_{m,n})\}$ ². Ziel ist es nun, das Prozessmodell als *Ersatz* für den realen Prozesses zu verwenden, um für eine konkrete Menge $\{c_l\}$ die $\{e_m\}$ rechnerisch zu bestimmen. Das Modell *simuliert* die Realität, zum Beispiel durch die *Integration* eines differential-algebraischen Gleichungssystems im Zustandsraum

$$\frac{d}{dt}z_p(t) = f_p(z_p(t), x_i(t), p_k, t) \quad (1)$$

$$y_j(t) = g_j(z_p(t), x_i(t), p_k, t) \quad (2)$$

Die in Abb. 2 skizzierten *direkten* Prozessmodelle folgen in der Wahl der Modelleingänge den Kausalitätsbeziehungen des realen Prozesses. Liefern diese Modelle auch nicht messbare Größen, so kann mit Hilfe des Modells eine indirekte Messung dieser Größe durchgeführt werden. Stehen diese Prozessmodelle zur Simulation realer Prozesse in ausführbarer Form zur Verfügung, so lassen sich daraus **Metamodelle** konstruieren, mit denen auch die praktisch relevanten indirekten Fragestellungen beantwortet werden können. Als Beispiel dient die betriebliche Aufgabenstellung in Abschnitt 3.3. Prozessmodelle sollten Rekursion unterstützen und es zulassen, dass ganze Netzwerke von Teilprozessmodellen wieder zu einem Gesamtprozessmodell zusammengefügt werden können. Indem das Modell eines komplexen Prozesses (z.B. ein Elektrolichtbogenofen) aus Teilmodellen aufgebaut wird, werden beliebig komplexe Systeme modellierbar. Diese Vorgehensweise ist aus der Elektrotechnik und der chemischen Verfahrenstechnik hinreichend bekannt. Aus Sicht der Wissenschaft ist die oft fehlende Transparenz und Einfachheit der Modelle zu bemängeln. Aus Sicht der Hochtemperaturverfahrenstechnik fehlen oft die notwendigen Elementarbausteine, so dass selbst einfache Vorhersagen mit einem erheblichem Entwicklungsaufwand verknüpft sind. Die Verwendung der o.g. Wolfram Language kann hier Abhilfe schaffen, da sowohl für die Erstellung der einzelnen Prozessmodelle (Bausteine) als auch für deren Vernetzung Konzepte zur Verfügung stehen. Die Abstraktionsebene dieser Programmiersprache und die Vielzahl der nutzbaren Funktionen erlaubt effiziente Problemlösungen, sowohl auf der Einzelmodellebene, als auch auf der Vernetzungsebene (obgleich der zugehörige grafische Editor, der sog. System Modeller, noch nicht wesentlich über

²Indizes: Messgröße m , Zeitpunkt n

den Stand der Technik hinausgeht). Dabei wird für eine Übergangszeit die Wolfram Language nicht durchgängig zu verwenden sein, sondern im Extremfall intern zunächst weiter die bekannten Werkzeuge (z.B. OpenFOAM, Abaqus, ...) zur Lösung der mathematischen Modelle erfordern. Die Entwicklung der letzten Jahrzehnte zeigt jedoch, dass spezielle CAE Werkzeuge entweder automatisiert einsetzbar werden oder vom Markt verschwinden. Im CAE Bereich wird das hier propagierte verallgemeinerte Konzept der Prozessmodellierung in Zukunft zur Automatisierung der bisherigen Aufgaben führen, die die Arbeit der Ingenieure dann im wesentlichen auf die Ebenen der Prozessspezialisten und der Systemarchitekten verlagern. Die Reduzierung der Dimensionalitäten in den Parameterabhängigkeiten lässt sich nur selten automatisieren und ist *mission critical* für die Beherrschbarkeit der Gesamtsysteme.

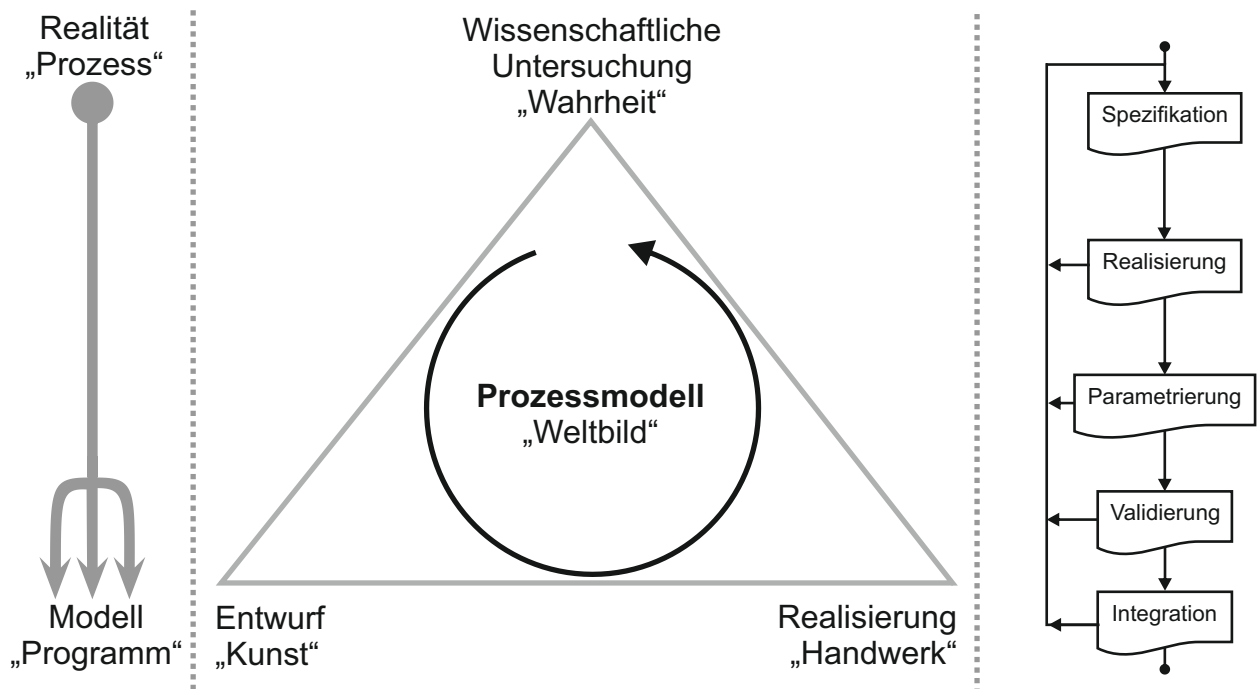


Abb. 3: Die Aufgabenstellung der Prozessmodellierung.

2.2 Arbeitsablauf (workflow)

Wie in Abb. 3 skizziert, entstehen Prozessmodelle als Abbilder des realen Prozesses. Ein und derselbe Prozess kann durchaus von unterschiedlichen Modellen beschrieben werden. Die Prozessmodellierung ist im Spannungsfeld von drei Tätigkeiten zu betrachten:

1. Der wissenschaftlichen Suche nach der **Wahrheit** über die den Prozess bestimmenden Naturgesetze und Phänomenologien.
2. Der **Kunst** des Entwurfs eines die wesentlichen Aspekte der komplexen Realität abbildenden Modells.
3. Dem **Handwerk** der Realisierung des Prozessmodells als Software.

Der Arbeitsablauf der Prozessmodellierung besteht aus folgenden Teilaufgaben:

1. **Spezifikation** (Aufgabenstellung, **Schnittstelle**, Pflichtenheft).

2. **Realisierung** (Entwurf, Planung, **Programmierung**).
3. **Parametrierung** (Bestimmung der p_k aus Labormessungen und Betriebsdaten).
4. **Validierung** (Vergleich der Vorhersagen mit den Messungen) oder **Falsifikation**.
5. **Systemintegration** und Modelleinsatz.

Es ist dabei wichtig und zielführend, zunächst mit starken Vereinfachungen alle Punkte nacheinander abzuarbeiten. In der Regel können auftretende Probleme nur durch Änderungen in den jeweils vorherigen Teilaufgaben gelöst werden, so dass sich insgesamt eine iterative Vorgehensweise ergibt. Die Produktivität hängt dann sehr stark von der Entwicklungsumgebung und den vom konkreten Modell unabhängigen Werkzeugen ab, die insbesondere für die Teilaufgaben 1, 3 und 4 herangezogen werden können. Die Entwicklungsumgebung muss universelle Werkzeuge zur Analyse, Parametrierung und Validierung der Modelle bereit stellen. Eine Qualitätssicherung erfordert in allen Arbeitsbereichen der Prozessmodellierung spezielle Werkzeuge und Metriken.

Die Quantifizierung von Unsicherheiten in den Ausgangsgrößen (*Messgenauigkeit*) und die Quantifizierung der Korrelationen (*Sensitivitätsanalyse*) sind dabei von besonderer Bedeutung. Mit Hilfe des Modells lässt sich auch überprüfen, für welche Parameter eine Parametrierung überhaupt durchführbar ist und welche Modellausgänge dann mit welcher Genauigkeit vorhergesagt werden können. Wie eine Messung liefert auch ein Modell ein Ergebnis, welches mit einer systematischen Unsicherheit behaftet ist. Prozessmodelle dienen auch der *indirekten Messung*, bei der nicht direkt messbare Größen vorhergesagt werden. Wie in Abschnitt 4 finden sich in der Hochtemperaturverfahrenstechnik viele Beispiele für wichtige Prozesskenngrößen, die nur indirekt mittels Modellen ermittelt werden können. Sind Modellparameter auch in anderen Modellen nutzbar (keine reinen Fitparameter), so handelt es sich bei der Modellparametrierung um eine indirekte Messung dieser Parameter.

In der Regel soll ein Prozessmodell für eine größere Anzahl von Einsatzfällen (Laufindex ξ) mit unterschiedlichen Stellgrößen die zugehörigen Messgrößen richtig vorhersagen. Aus n_ξ Datensätzen liefert die *Modellstrukturbestimmung* dasjenige Modell, welches diese Messdatenmenge optimal abbildet. Dazu werden in der Regel Modellkandidaten ausgewählt und die zu schätzenden Parameter identifiziert. Für jeden dieser Modellkandidaten ist dann die Menge der Modellparameter $\{p_k\}$ zu schätzen. Diese Parametrierung wird auch als *Modellkalibrierung* bezeichnet.

Warum Prozessmodelle auf der Grundlage von Naturgesetzen den rein datenbasierten Modellen vorzuziehen sind, ist aus der Skalierung der aus den Betriebsdaten zu bestimmenden Parameter sofort ersichtlich. Bei Modellen auf naturwissenschaftlicher Grundlage sind derartige Fitparameter idealerweise (wie im folgenden Beispiel) nicht notwendig. Ein rein datenbasiertes Modell mit n Eingängen und m Ausgängen benötigt bereits in der einfachsten Ausführung als lineares Modell $m \cdot (n + 1)$ anzupassende Parameter.

Eine *Parameterschätzung* $\{\hat{p}_k\}$ minimiert für alle n_ξ Einsatzfälle die Abweichung zwischen den Modellvorhersagen $\{y_j(t_{m,n})\}_\xi^M$ und den Messwerten $\{y_j(t_{m,n})\}_\xi$. Es handelt sich um ein nicht-triviales Regressionsproblem, das mit gängigen Optimierungsverfahren gelöst werden kann. Die Auftragung und Statistik der berechneten gegen die gemessenen Ausgangsgrößen (siehe Abb. 9) liefert dann für die einzelnen Ausgänge eine Einschätzung der Modellqualität, die als Netzdiagramm visualisiert werden kann. Im Ergebnis kann auch der simultane Einsatz mehrerer Modelle, die jeweils einzelne Ausgänge besonders gut vorhersagen, erforderlich werden.

Beim praktischen Einsatz von betrieblichen Prozessmodellen, deren Ein- und Ausgänge sich nicht an den Kausalitäten des Prozesses orientieren müssen, treten oft Aufgabenstellungen auf, die erst über Optimierungsverfahren gelöst werden können. Diese Art der *Metamodellierung* wird im folgenden Abschnitt 3 ebenfalls demonstriert.

3 Beispiel Kühlstrecke

An Hand dieses Beispielen soll das Zusammenspiel von Modellierung, Laborexperimenten und Anwendungsorientierung demonstriert werden. Als Prozess wurde eine Bandkühlstrecke mit Spritzkühlung ausgewählt: Nach dem Warmwalzen ist ein Metallband definiert abzukühlen [12]. Der Effekt unterschiedlicher Abkühlraten auf die mechanischen Eigenschaften liegt in derselben Größenordnung wie der Einfluss der Legierungselemente [13], man spricht daher vom Legierungselement Wasser. Es wird demonstriert, wie es möglich ist, die optimale Gestaltung des Abkühlprozesses bei der Spritzkühlung rechnerisch vorherzusagen [14].

3.1 Problemstellung

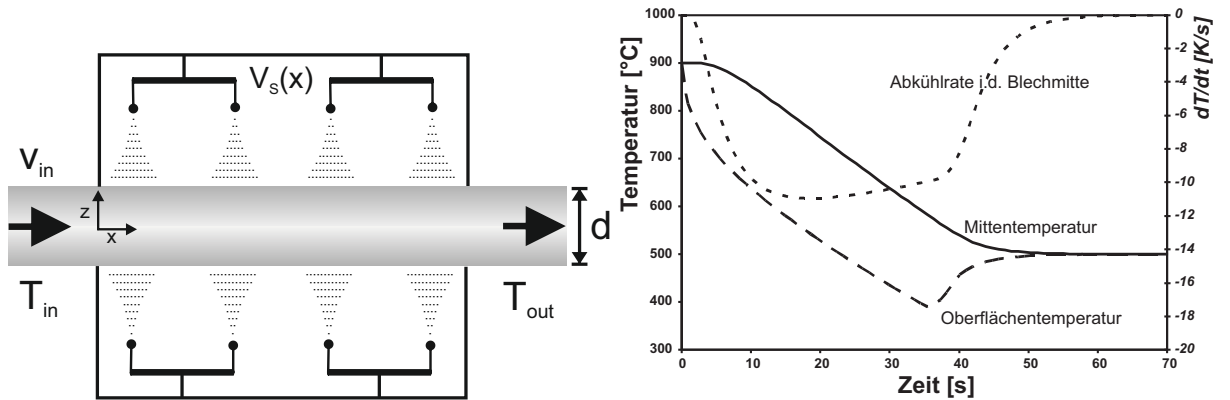


Abb. 4: Schema einer Bandkühlstrecke und Abkühlkurven für 30 mm dickes Grobblech [14].

Das in Abb. 4 skizzierte Schema verdeutlicht die Funktion und die wesentlichen Parameter des kontinuierlichen Abkühlprozesses: Ein Material der Dicke d läuft mit der Geschwindigkeit v_{in} und der Einlauftemperatur T_{in} in die Kühlstrecke ein und verlässt diese mit einer (näherungsweise) homogenen Auslauftemperatur T_{out} . Die letztere Annahme setzt für den Fall größerer Dicken d voraus, dass dem Material nach der aktiven Kühlung ein Temperatúrausgleich ohne weitere Abkühlung von außen ermöglicht wird (*self tempering*).

Das Material lässt sich näherungsweise durch eine mittlere Temperaturleitfähigkeit

$$a = \lambda / (\rho c_p) \quad (3)$$

charakterisieren. Der Wärmeübergang vom Material an das Kühlmedium (Wasser) sei charakterisiert durch den lokalen Wärmeübergangskoeffizienten α , der über

$$q = \alpha \cdot \Delta T \quad (4)$$

definiert ist. q sei die Wärmestromdichte weg von der Oberfläche des Materials und

$$\Delta T = T_s - T_w \quad (5)$$

die Differenz zwischen der lokalen Oberflächentemperatur T_s und der Wassertemperatur T_w . α ist eine Funktion der Kühltechnikparameter und der lokalen Oberflächentemperatur. Unter den Kühltechnikparametern dominiert die Wasserbeaufschlagungsdichte V_s .

Im ortsfesten Koordinatensystem (*Euler-Bild*) wird die Kühlstrecke durch einen ortsabhängigen Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha(x)$ beschrieben. Dann ist $q(x)$ durch die Wasserbeaufschlagungsdichte $V_S(x)$ und die sich ergebende Oberflächentemperaturverteilung $T_S(x)$ determiniert. $V_S(x)$ wird wiederum durch Art, Position und Betriebsparameter der einzelnen Spritzdüsen eingestellt. Im stationären Betrieb wird die Kühlstrecke durch die Parameter

$$p_k = \{T_{\text{in}}, v_{\text{in}}, d, a, \lambda, V_S(x)\} \quad (6)$$

bestimmt. $V_S(x)$ bzw. $\alpha(x)$ sollte mit möglichst wenigen Stützstellen bemustert werden können. Wie Abb. 6 zeigt, ermöglicht schon die Annahme eines einfachen linearen Verlaufs für $\alpha(x)$ eine hinreichend genaue Realisierung der gewünschten Abkühlrate. Im stationären Betrieb ergibt sich nur eine einzige direkt messbare Ausgangsgröße $y_1 = \{T_{\text{out}}\}$.

Dieses Beispiel zeigt, wie bereits in der Definitionsphase eines Prozessmodells Annahmen und Vereinfachungen gemacht werden. Dies vermindert die Anzahl der Ein- und Ausgänge, unter Umständen auf Kosten der Allgemeingültigkeit. Es ist dabei oft sinnvoll, zunächst nur diejenigen Details eines Prozesses zu berücksichtigen, die praktisch oder physikalisch hoch relevant sind. Eine spätere Verfeinerung ist immer einfacher, als auf Anhieb ein hoch komplexes Modell realisieren zu wollen. Können die Modellierziele – wie in diesem Beispiel – nur mit einem Metamodell erreicht werden, so ist dieses ebenfalls zu definieren und zu diskutieren.

3.2 Physikalische Aufgabenstellung (direktes Modell)

Eingang	Einheit	Kommentar
v_{in}	m/s	Durchlaufgeschwindigkeit
d	m	Blechdicke
a	m ² /s	Temperaturleitfähigkeit
λ	W/(m K)	Wärmeleitfähigkeit
$V_S(x)$	kg/(m ² s)	lokale Wasserbeaufschlagungsdichte
T_{in}	K	Einlauftemperatur
Ausgang	Einheit	Kommentar
T_{out}	K	Mittlere Auslauftemperatur
CR	K/s	mittlere Abkühlrate in Blechmitte (Glg. 7)
ΔCR	K/s	Variation der Abkühlrate in Blechmitte (Glg. 8)
$T_{S,\text{Min}}$	K	Minimale Oberflächentemperatur

Tab. 1: Definition des Prozessmodells Kühlstrecke (physikalische Aufgabenstellung).

Die Lösung der *physikalischen Aufgabenstellung*, der Verlauf der Funktion $T(z, t)$, ist in Abb. 4 dargestellt und kann zum Beispiel durch die Auslauftemperatur T_{out} , die mittlere Abkühlrate in Blechmitte CR , deren Variation ΔCR und die minimale Temperatur an der Blechoberfläche $T_{S,\text{Min}}$ charakterisiert werden; Details finden sich in [1].

In den Definitionen

$$CR = \frac{2}{d \cdot (t_{S,\text{Min}} - t_{SC})} \int_{z=0}^{z=d/2} \int_{t=t_{SC}}^{t=t_{S,\text{Min}}} \frac{\partial}{\partial t} T(z, t) dt dz \quad (7)$$

und

$$\Delta CR = \frac{2}{d \cdot (t_{S,\text{Min}} - t_{SC})} \int_{z=0}^{z=d/2} \int_{t=t_{SC}}^{t=t_{S,\text{Min}}} \sqrt{\left(CR - \frac{\partial}{\partial t} T(z, t) \right)^2} dt dz \quad (8)$$

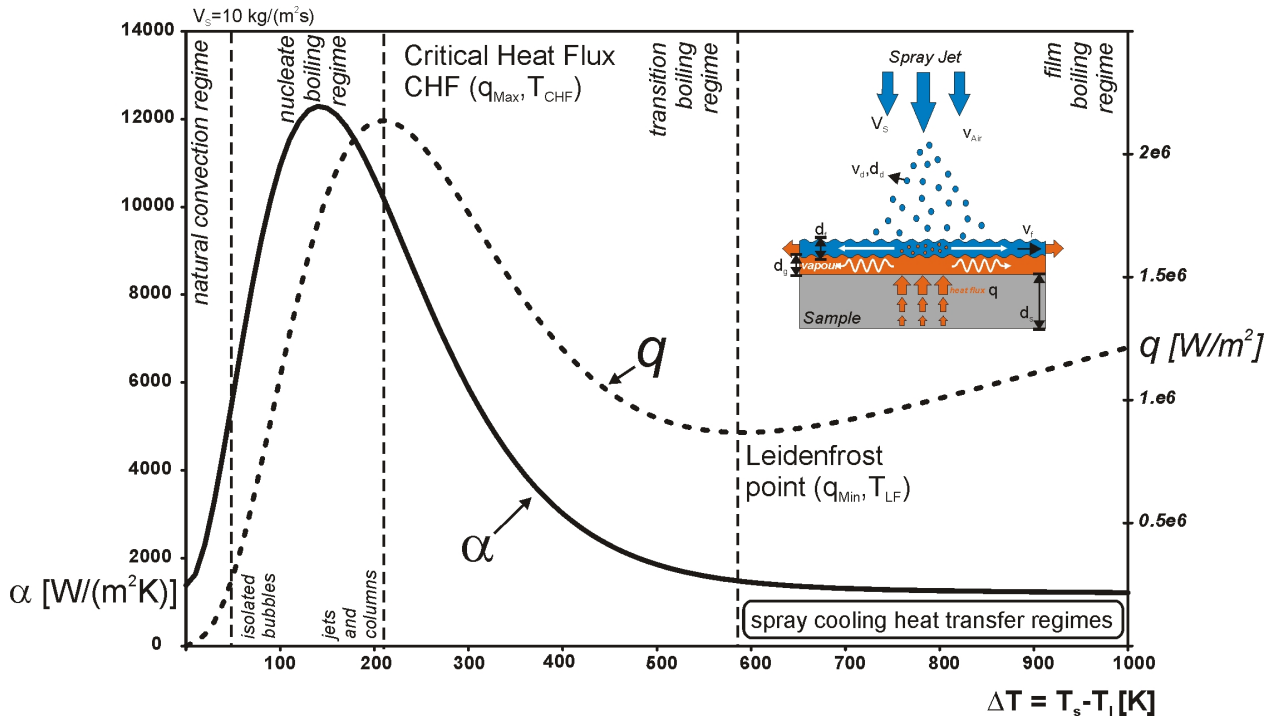


Abb. 5: Der Wärmeübergang bei der Spritzkühlung (Nukiyama-Kurve) [14].

ist t_{SC} der Zeitpunkt des Einsetzens der Kühlung und $t_{S,Min}$ der Zeitpunkt minimaler Oberflächen-temperatur.

Die Aufgabenstellung des physikalischen Prozessmodelles ist somit die Berechnung von $T(z, t)$ durch Lösung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} T(z, t) = a \cdot \frac{\partial^2}{\partial z^2} T(z, t) \quad (9)$$

mit den Neumannschen Randbedingungen $q = 0$ in der Blechmitte ($z = d/2$, unter Annahme einer an der Ober- und Unterseite gleichartigen Kühlung) und

$$q = \lambda \frac{\partial T}{\partial z} = \alpha(\Delta T, V_s) \cdot \Delta T \quad (10)$$

an der Blechoberfläche ($z = 0$). Der Wärmeübergang lässt sich im Labor vermessen und über eine Fit-Funktion in das Modell integrieren. Nach [15] gilt für $\alpha(\Delta T, V_s)$ in W/(m²K)

$$\alpha(\Delta T, V_s) = (190 \pm 25) + \tanh\left(\frac{V_s}{8}\right) \cdot \left((140 \pm 4) \cdot V_s \left[1 - \frac{V_s \cdot \Delta T}{72000 \pm 3500} \right] + (3.26 \pm 0.16) \cdot \Delta T^2 \left[1 - \tanh\left(\frac{\Delta T}{128 \pm 1.6}\right) \right] \right) \quad (11)$$

Mit der Wasserbeaufschlagungsdichte V_s (in kg/(m²s)) wird die Abkühlrate an der Oberfläche beeinflusst. Für die Spritzkühlung finden sich der Stand der Technik und die Details der Labormessung der Nukiyama Kurven (Abb. 5) in [1, 15, 16, 17, 18, 19].

Einen ähnlichen Verlauf für den Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha(V_s, T)$ erhält man auch aus Betriebsdaten [20] – mit allen Schwierigkeiten in Bezug auf die Nachweisbarkeit und Genauigkeit der Parameterabhängigkeiten.

Mit den o.g. Randbedingungen wird die partielle Differentialgleichung (9) numerisch gelöst. Das Ergebnis sind Abkühlkurven $T(z, t)$ (siehe zum Beispiel Abb. 4). Deren Verlauf wird über $T_{S,Min}$, CR und ΔCR quantifiziert. So löst das Prozessmodell die physikalische Aufgabenstellung. Eine interaktive Schnittstelle findet sich unter prmc.de.

3.3 Betriebliche Aufgabenstellung (Metamodell)

Eingang	Einheit	Kommentar
v_{in}	m/s	Durchlaufgeschwindigkeit
d	m	Blechdicke
a	m ² /s	Temperaturleitfähigkeit
λ	W/(m K)	Wärmeleitfähigkeit
T_{in}	K	Einlauftemperatur
T_{out}	K	Auslauftemperatur
CR	K/s	mittlere Abkühlrate in Blechmitte (Glg. 7)
$T_{S,Min}$	K	Minimal zulässige Oberflächentemperatur
Ausgang	Einheit	Kommentar
l	m	Länge der Kühlstrecke
$V_S(x)$	kg/(m ² s)	lokale Wasserbeaufschlagungsdichte
ΔCR	K/s	Variation der Abkühlrate in Blechmitte (Glg. 8)

Tab. 2: Definition des Metamodells Kühlstrecke (betriebliche Aufgabenstellung).

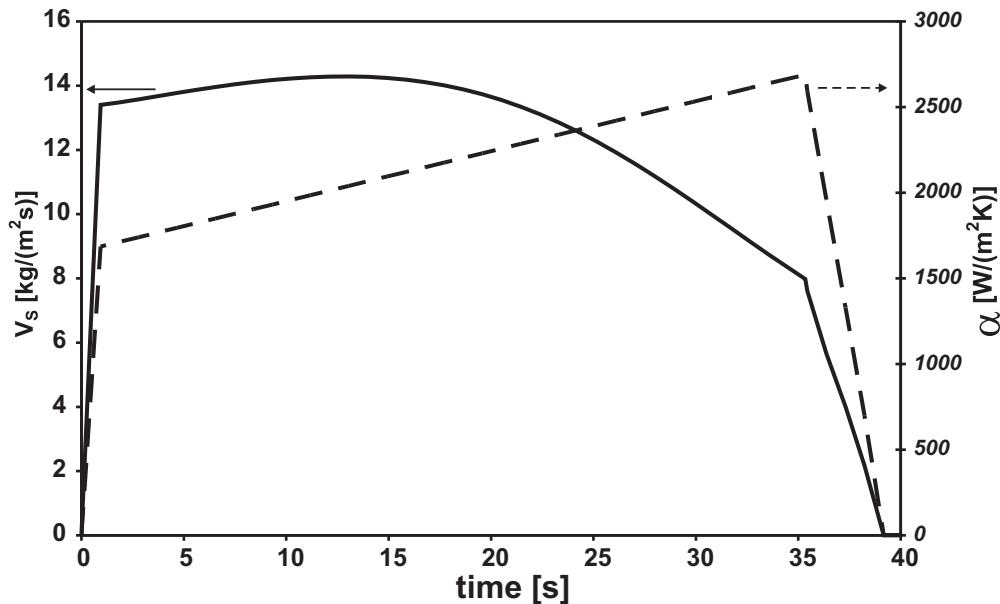


Abb. 6: Die Lösung des betrieblichen Problems [14].

Verglichen mit der zuvor behandelten direkten physikalischen Aufgabenstellung, ist die *betriebliche Aufgabenstellung* eine andere: Hier muss die Kühlstrecke so dimensioniert werden, dass alle Kühlaufgaben möglichst optimal ausgeführt werden können. Die optimale Umsetzung einer einzelnen Kühlaufgabe besteht aus der Realisierung einer für diese Kühlaufgabe optimalen Wasserbeaufschlagungsdichte $V_S(x)$. Eine flexible Spritzkühlstrecke lässt sich mit einzeln ansteuerbaren

und gegebenenfalls auch verfahrbaren Düsen mit möglichst großem Regelbereich realisieren. Die optimale Kombination aus Düsenpositionen und -parametern läßt sich wiederum mit Hilfe eines weiteren Prozessmodells ermitteln. Die notwendige Gesamtlänge der Kühlstrecke ist gleich dem Maximalwert $\text{Max}\{l\}$, der sich aus den zu realisierenden Einsatzfällen $\{v_{\text{in}}, CR, d, \dots\}$ ergibt.

Für jede Kühlaufgabe ist die jeweils optimale Wasserbeaufschlagungsdichte $V_S(x)$ zu berechnen und einzustellen (für die überlagerte Wasserbeaufschlagungsdichte der Düsen gilt ein Superpositionsprinzip [21]). Damit ergeben sich für das Meta-Prozessmodell zur Lösung der betrieblichen Aufgabenstellung folgende Teilaufgaben:

1. Berechne für einen vorgegebenen Parametersatz $p_k = \{v_{\text{in}}, d, a, \lambda, T_{\text{in}}, T_{\text{out}}, CR, T_{S,\text{Min}}\}$ eine Funktion $V_S(x)$, mit der die vorgegebene Auslauftemperatur und die vorgegebene mittlere Abkühlrate CR erreicht wird, ohne eine minimale Oberflächentemperatur $T_{S,\text{Min}}$ zu unterschreiten, bei zugleich minimaler Variation der Abkühlrate ΔCR . Diese Aufgabe definiert ein Prozessmodell, welches hier als invers bezeichnet wird, da es die Lösung von (9) zur Lösung eines Optimierungsproblems heranzieht.
2. Berechne die Düsenpositionen und Betriebsparameter, die $V_S(x)$ realisieren.

Das physikalische Prozessmodell berechnet aus den in Tabelle 1 angegebenen Eingangsgrößen den Temperaturverlauf in der Kühlstrecke und daraus die Ausgangswerte T_{out} , CR , ΔCR und $T_{S,\text{Min}}$. Die Kühlstreckenparameter werden hier zunächst über die Funktion $V_S(x)$ festgelegt, der nach (10) eine Verteilung des Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha(x)$ entspricht.

Aus Sicht des betrieblichen Prozessmodells hingegen ist $V_S(x)$ gemäß Tabelle 2 eine vorherzusagende Ausgangsgröße, während T_{out} , CR und $T_{S,\text{Min}}$ Eingangsgrößen darstellen.

Für die betriebliche Aufgabenstellung ist somit ein inverses Problem zu lösen. Gesucht sind diejenigen Randbedingungen an der Oberfläche, die zu dem gewünschten Temperaturverlauf im Material führen – im Rahmen des physikalisch Möglichen. Als Parameter dienen die gewünschte Auslauftemperatur T_{out} , die gewünschte Abkühlrate CR sowie die minimal erlaubte Oberflächentemperatur $T_{S,\text{Min}}$.

Es sind nun die Verlaufparameter der Wärmeübergangsfunktion $\alpha(x)$ derart zu bestimmen, dass der zugehörige $T(z, t)$ -Verlauf die Zielgrößen T_{out} , CR und $T_{S,\text{Min}}$ genau trifft und dabei ΔCR minimiert. Für jeden $\alpha(x)$ -Verlauf wird das direkte Prozessmodell gelöst und aus der $T(z, t)$ -Funktion die Größen T_{out} , CR , ΔCR und $T_{S,\text{Min}}$ berechnet. Ein Optimierungsalgorithmus variiert nun $\alpha(x)$ so lange, bis die Zielwerte getroffen werden. Aus $\alpha(x)$ wird dann mittels der impliziten Gleichung (11) die optimale Wasserbeaufschlagungsdichte $V_S(x)$ numerisch berechnet.

Zur optimalen Abkühlung von 30 mm dickem Grobblech mit 10 K/s in der Blechmitte ist beispielsweise bei einer Durchlaufgeschwindigkeit von 1 m/s eine ca. 40 m lange Kühlstrecke mit einer zunächst leicht steigenden und dann fallenden Wasserbeaufschlagungsdichte von ca. 12 kg/(m²s) erforderlich. Zu dem inversen Prozessmodell findet sich ebenfalls unter prmc.de eine interaktive Schnittstelle.

3.4 Optimale Anlagenauslegung und Diskussion

Die Konzeption und die Auslegung von Hochtemperaturprozessen erfolgt in zunehmenden Maße mit Hilfe von Prozessmodellen. Wer diese effizient generieren kann, erlangt in Bezug auf die Kosten und die Geschwindigkeit des Engineerings Wettbewerbsvorteile. Dies gilt auch, wenn das zur zielführenden Beschreibung der Anlage erforderliche mathematische Modell eine etwas aufwendigere numerische Lösung erfordert – wie das in diesem Beispiel der Fall ist.

Die optimale Auslegung einer Kühlstrecke hängt von der Menge der zu lösenden Kühlaufgaben ab. Daraus folgen die n_ζ Parametersätze $\{p_k\}_\zeta$ für das betriebliche Prozessmodell. Für diese können vorab optimale Verläufe des Wärmeüberganges berechnet werden. Die Auslegungsparameter der Anlage (Länge l_{Max} , Düsenzahl, Verfah- und Regelbereich) lassen sich dann derart festlegen, dass alle n_ζ Kühlaufgaben optimal erfüllt werden können.

Am Beispiel einer Durchlaufkühlstrecke mit Spritzkühlung wurden folgende Aspekte der Prozessmodellierung herausgearbeitet:

- Wenn sich nicht alle Details auf der Basis bekannter Zusammenhänge vorhersagen lassen, hilft eine Unterteilung in berechenbare und im Labor experimentell beherrschbare Teilsysteme weiter. Fitparameter, die nur über Betriebsdaten zu kalibrieren sind, sollten eher als *ultima ratio* angesehen werden.
- Der Fluch der Dimensionalität impliziert, dass ein physikalisch fundiertes Prozessmodell dem rein regelungstechnischen Ansatz der datenbasierten Modellierung immer überlegen ist (vergleiche [20] mit [14]). Es erlaubt zudem eine optimale Anlagenauslegung bereits in der Planungsphase.
- Direkte physikalische Modelle liefern Aussagen in Kausalitätsrichtung – welche Wirkung hat eine bestimmte Ursache? Betriebliche Fragestellungen erfordern in der Regel deren Invertierung – wie ist eine Ursache zu gestalten, um eine bestimmte Wirkung zu erzielen?
- Abgesehen von der erforderlichen logischen Tiefe (Rechenaufwand) ist es für den Nutzer eines Prozessmodells unerheblich, ob dieses intern auf die Lösung von Gleichungen, Differentialgleichungen, Optimierungen oder andere Simulationstechniken zurückgreift: Das Konzept der Prozessmodellierung stellt eine universelle Schnittstelle zu Modellen und Simulationstechniken dar.

Das hier verwendete Beispiel stellt in folgender Beziehung einen durchaus erstrebenswerten Extremfall dar:

- Es benötigt keine Fit-Parameter, die aus Betriebsdaten gewonnen werden müssen.
- Es ist im Labor parametrier- und validierbar.
- Es basiert auf der Lösung einer partiellen Differentialgleichung und ist trotzdem hoch performant.
- Die Lösung des (inversen) betrieblichen Problems gelingt mit gängigen Optimierungsalgorithmen.

Im nächsten Abschnitt 4 werden die praktischen Schwierigkeiten bei der Modellparametrierung auf der Basis von Betriebsdaten kurz diskutiert.

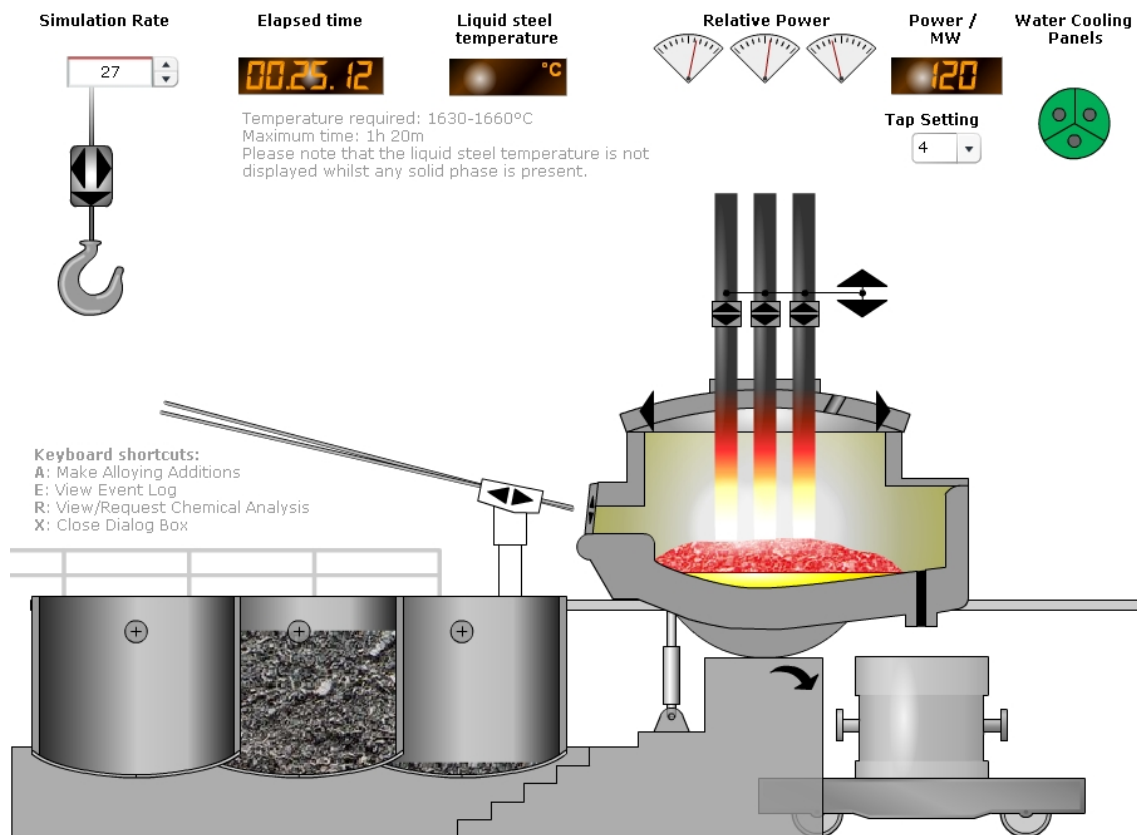


Abb. 7: Elektrostahlerzeugung (Prozessmodell der Steel University).

4 Beispiel Elektrostahlerzeugung

In diesem Beispiel soll es um die in der Praxis auftretenden Schwierigkeiten bei der Modellparametrierung gehen. Dazu wird der Ausgangspunkt der Elektrostahlerzeugung, das Einschmelzen von Schrott und anderen Eisenträgern im Elektrolichtbogenofen (EAF), betrachtet [23, 22]. Wie in Abb. 8 dargestellt, kann mit einem Prozessmodell des Einschmelzprozesses zunächst einmal die Betriebsweise optimiert werden – hier sind u.U. signifikante Einsparungen möglich. Die in Abb. 8 dargestellte Zwischenüberhitzung ist anschaulich am Beispiel des möglichst schnellen Einschmelzens von Eis plausibel.

Zur Parameteridentifikation bei EAF Prozessmodellen lag kein explizites Schrifttum vor. In [24] findet sich jedoch eine grafische Darstellung der Modellvorhersagen an einem Wechselstrom EAF mit Doppelgefäß. Diese Daten sind in Abb. 9 dargestellt. Die 153 Messwerte aus [24] (beide Ofengefäße) zeigen betragsmäßig eine mittlere Abweichung zwischen Modell und Experiment von 19 K (Median *west shell*) bis 27 K (Mittelwert, *east shell*). Damit ist das Modell circa 9 K bis 15 K besser als das triviale Modell, dem Mittelwert aller Messwerte (*east*: $1635 \pm 34^\circ\text{C}$, *west*: $1620 \pm 36^\circ\text{C}$).

Mit Hilfe von Betriebsdaten eines 100 t Gleichstrom-EAF [25] wurde mit einem eigenen Modell (EAF09, eine Verbesserung von EAF08 [22]) eine Parametrierung versucht. Diese scheiterte jedoch an den fehlenden Messungen der Sumpfmengen. Im Gegensatz zu Wechselstromöfen benötigen Gleichstromöfen zur verschleissarmen Stromabfuhr über die im Gefäß verbaute Anode eine gewisse Restmenge an Schmelze (Sumpf). Die Betriebsdaten wiesen auf eine Fahrweise hin, die zu stark variierenden Sumpfmengen führt. Die Sensitivität der Schmelzentemperatur bezüglich der Sumpf-

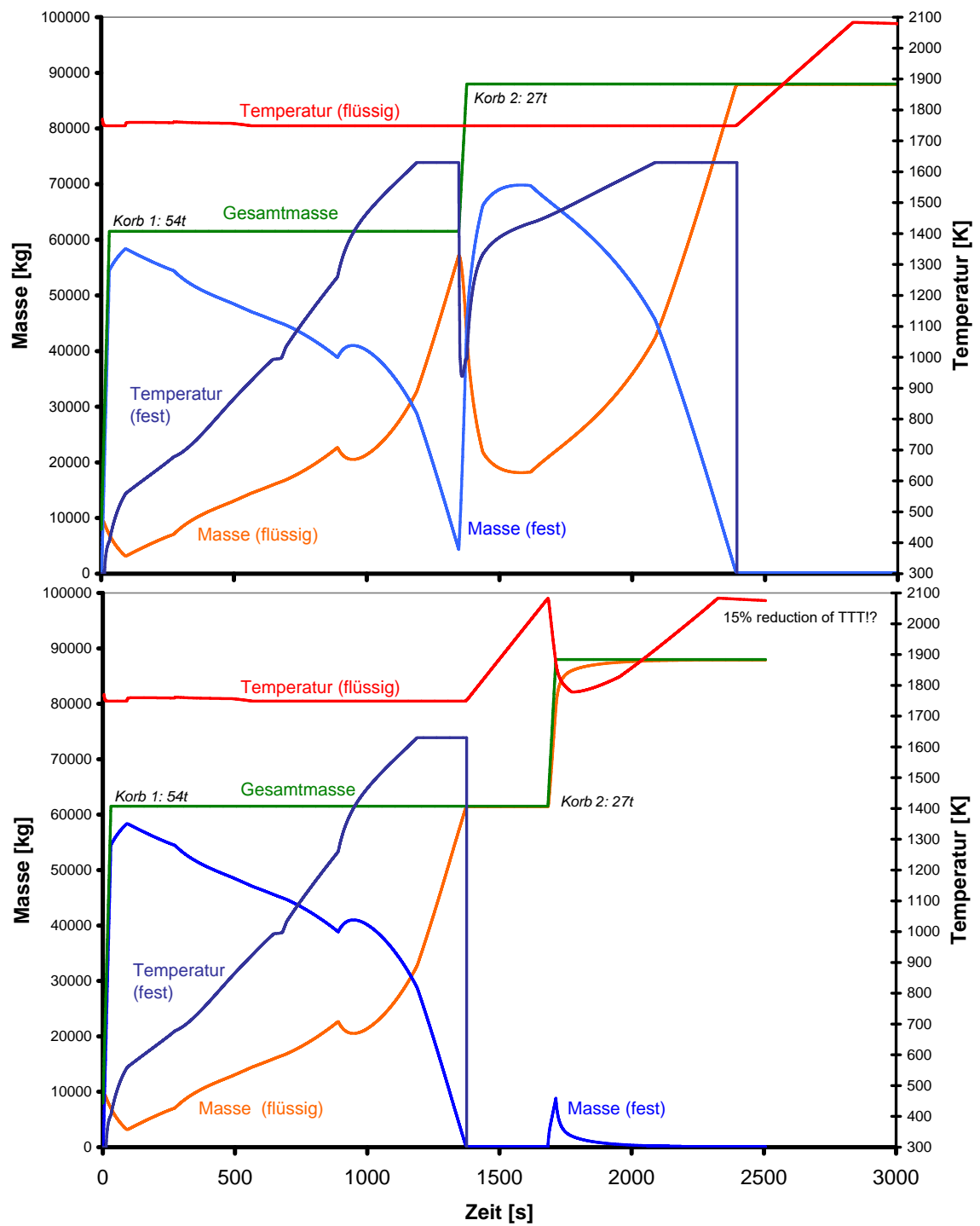


Abb. 8: Normale (oben) und optimale (unten) EAF Fahrweise nach [22].

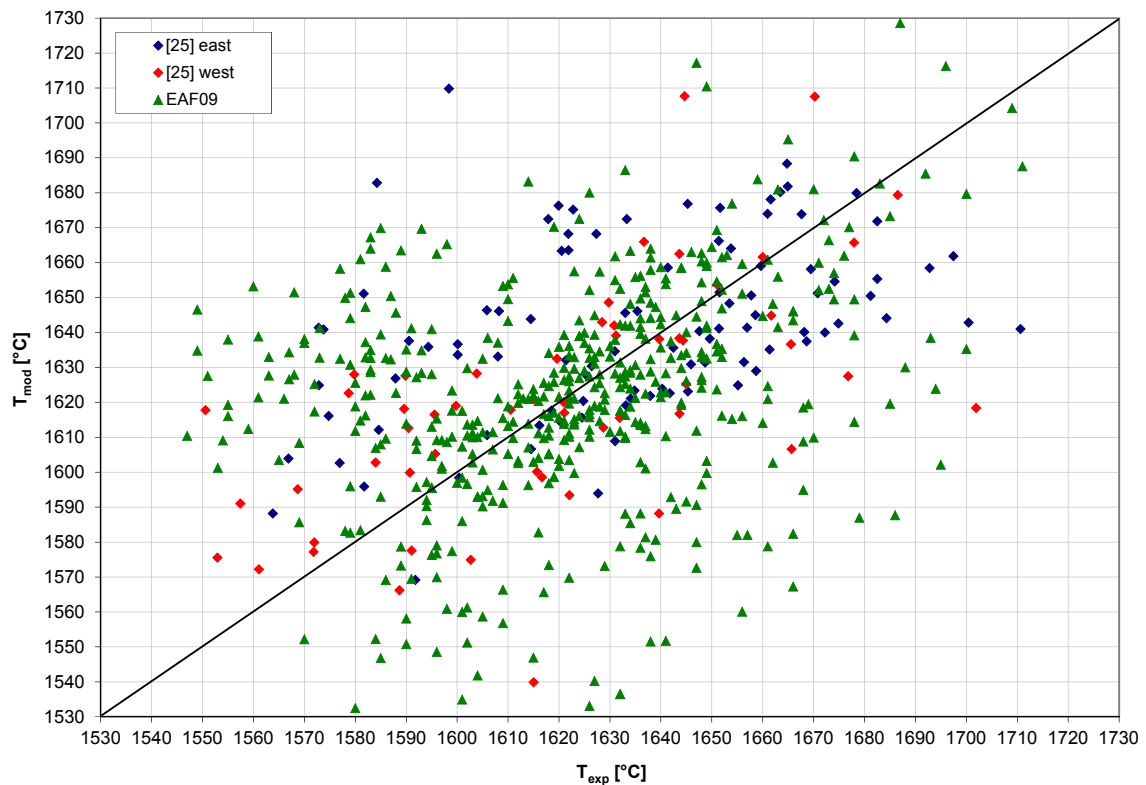


Abb. 9: Ergebniss der Parametrierung von Prozessmodellen ([1], siehe Text).

menge ist jedoch so groß, dass die Fitparameter des Modells nicht ermittelt werden können. Unter Annahme einer Sumpfmenge von 10 t und dem Ausschluß von 10 % der mit diesem Wert am schlechtesten berechenbaren Schmelzen ergibt sich zunächst eine Fit-Qualität von 30 bis 40 K für 651 Datensätze (Schmelzen). Werden davon 256 Datensätze ausgewählt und wird die Sumpfmenge mit optimiert (Ergebnis 10,5 t), so ergibt sich eine Abweichung von 18 K (Median) bis 28 K (Mittelwert) – wiederum etwas besser als das triviale Modell ($T = 1622 \pm 31$ °C). Das in Abb. 9 dargestellte Streubild ähnelt demjenigen aus [24]. Es bleibt anzumerken, dass eine Parameteranpassung für ein zeitabhängiges Prozessmodell mit mehr als 3 Parametern und über 500 Datensätzen, die ja jeweils ca. 45 min Prozesszeit abbilden, in diesem Zusammenhang wohl erstmalig durchgeführt wurde.

Zur Parametrierung eines EAF Prozessmodells müssen folglich umfangreiche Messkampagnen durchgeführt werden, wobei auch eine Messung der Sumpfmengen, der Schlackenmengen sowie der Abgasmenge und -zusammensetzung erforderlich sind, siehe z.B. [26]. Zur Modellqualifizierung sollten dann auch Daten herangezogen werden, die die Fähigkeit des Modells zur Beschreibung von Abweichungen vom Normalbetrieb quantifizieren – ansonsten wird eher die Konstanz der Ofenfahrweise qualifiziert.

Aus einer Modellparametrierung kann sich daher auch ein neues Anforderungsprofil an die Betriebsdatenerfassung ergeben. Eine Modellvalidierung ergibt sich aus der genauen Vorhersage der Ergebnisse für eine möglichst repräsentative Menge von Einsatzfällen, die signifikant von den zur Modellparametrierung herangezogenen Datensätzen abweichen sollten. Eine Unterscheidung zwischen Inter- und Extrapolationsfähigkeit kann nur in Bezug auf einzelne Ein- bzw. Ausgänge getroffen werden.

5 Besonderheiten der Prozessmodellierung

Die Prozessmodellierung ist keine Teildisziplin der Verfahrenstechnik, sondern eine übergeordnete interdisziplinäre Aktivität. Jedes Prozessmodell erfordert schon in der Definitionsphase Detailkenntnisse über den Prozess selbst und den jeweiligen Stand der Technik. Die in verfahrenstechnischen Anlagen umgesetzten komplexen Netzwerke von Einzelprozessen müssen durch klug gewählte Systemgrenzen unterteilt werden. Die Grundlagen für eine Vielzahl von Prozessmodellen für die Hochtemperaturverfahrenstechnik wurden in [1] dargestellt. Grundsätzlich sollte ein Prozessmodell möglichst wenige Eingangsgrößen erfordern und direkt die wesentlichen Informationen über die Ergebnisse und den Verlauf eines Prozesses liefern. Da dies zudem mit einem möglichst geringem Rechenaufwand verbunden sein sollte, wurden in der Vergangenheit Prozessmodelle zunächst als Zonenmodelle [27] implementiert. In Anbetracht der vernachlässigbaren Grenzkosten von Rechenoperationen und mit der heutigen Verfügbarkeit von hohen Rechenleistungen können auch aus orts aufgelösten (CFD, FEM) Modellen Prozessmodelle abgeleitet werden, die dann genauere und weniger Fit-Parameter erfordernde Vorhersagen ermöglichen sollten [28, 29, 30].

Bei Hochtemperaturprozessen spielt oft die Stoffumsetzung eine wesentliche Rolle. Neben der Dosierung der Einsatzstoffe (Stöchiometrie) sind die thermochemischen Gleichgewichte von entscheidender Bedeutung. Eine Anbindung von thermochemischer Software (ChemApp [31], FactSage etc.) an ein Flowsheet Simulationswerkzeug (z.B. Aspen [32]) liefert hier eine rechnerische Analyse vorhandener Anlagen und neuer Prozessrouten, zum Beispiel für den Einsatz von Wasserstoff im Hochofen [33].

Für detaillierte (orts aufgelöste) Modelle hat sich das aus der Astrophysik stammende Konzept des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts (LTE, [34]) bewährt [29]. Die messbare Reaktorkinetik ist bei hohen Temperaturen nicht mehr durch den langsamsten reaktionskinetischen Teilschritt bestimmt, sondern durch den An- und Abtransport der Edukte und Produkte. Damit sind CFD Modelle hier die geeignete Wahl. Aus diesen lassen sich (wie auch aus FEM Modellen [30]) manuell oder automatisch Prozessmodelle ableiten [35, 36]. Diese Vorgehensweise lässt sich auch dann anwenden, wenn die betrachteten Phänomene die Simulation mehrerer Phasen und Skalen erfordern.

Bis in die 1970er Jahre wurden die Ergebnisse wissenschaftlicher Untersuchungen direkt in Form von Messwerten und *Formeln* reproduzierbar und falsifizierbar offen gelegt. Mit zunehmender Komplexität der erforderlichen Modelle (siehe Abb. 10) und der zugehörigen Messdaten wurden wissenschaftliche Veröffentlichungen dann immer schlechter reproduzierbar oder falsifizierbar. Die in Abb. 1 skizzierte Komplexitätsreduktion durch offene Prozessmodelle kann daher die Qualität wissenschaftlicher Arbeiten wesentlich erhöhen. Prozessmodelle können im **Computeable Document Format** publiziert werden. Sie ersetzen natürlich nicht einfachere Beschreibungen komplexer Zusammenhänge mit *Formeln*, auch falls diese nur – wie z.B. in [18, 19] – als Fit-Formeln zu verstehen sind.

In Abb. 10 wird die Prozessmodellierung (5, PM) als wichtige Entwicklungsebene der Modellierung *per se* dargestellt. Die Komplexitätsebene der mathematischen Formeln erlernen wir in der Schule und mit Gleichungssystemen (2, ES) können viele Studenten im MINT Bereich gut umgehen. Nach dem heutigen Stand der Technik sollte bis zur Ebene der gewöhnlichen Differentialgleichungen (3, ODE) von mathematischen Modellen gesprochen werden, die ohne größere Schwierigkeiten numerisch gelöst werden können. Im Bereich der partiellen Differentialgleichungen (4, PDE) tritt bereits die Software zur Lösung des mathematisch formulierten Modells in den Vordergrund. Die entsprechenden kommerziellen Softwaresysteme (Simulia, Ansys, COMSOL Multiphysics etc.) berücksichtigen zunehmend auch Aspekte der hier vorgestellten Prozessmodellierung (5, PM), insbesondere eine Parameteranpassung, um die Rechenergebnisse an Experimente

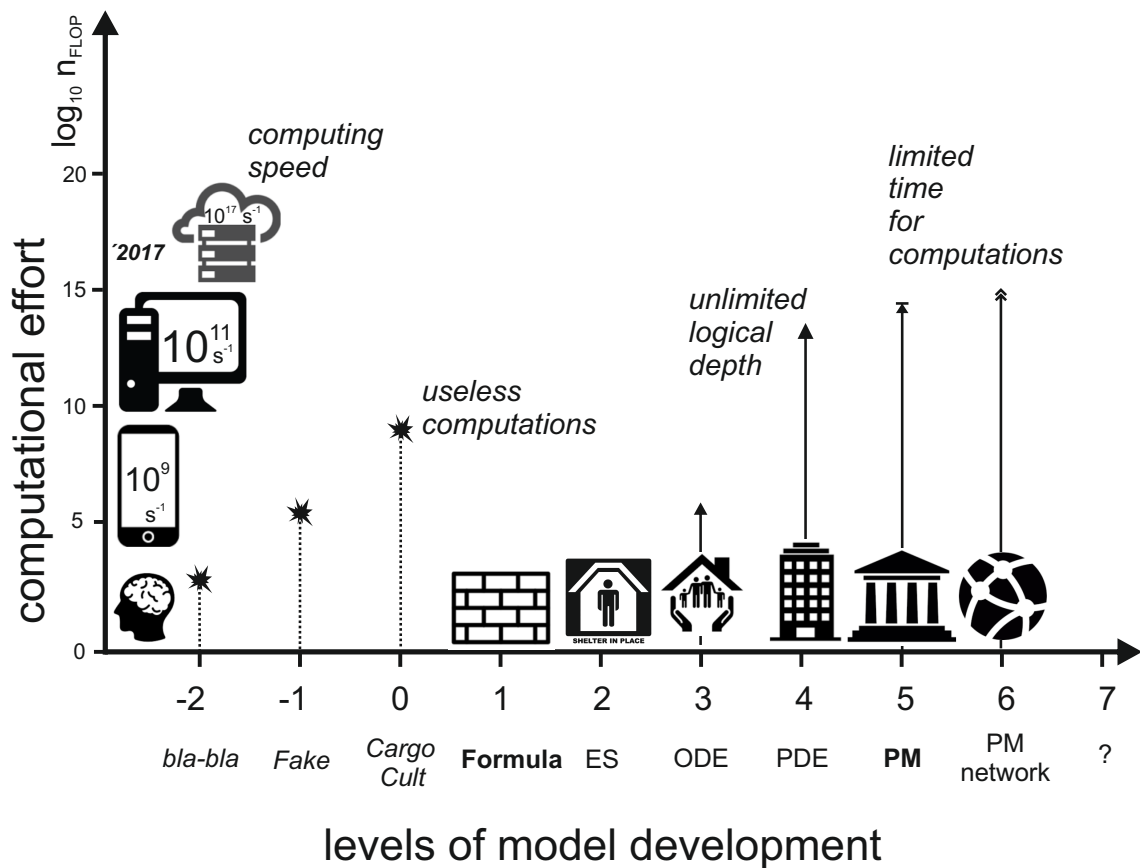


Abb. 10: Entwicklungsebenen der Modellierung: Bei gegebenem Funktionsumfang ist das einfachste Modell immer das beste. Zum Begriff Cargo Cult Science siehe [37, 38]

oder Kundenerwartungen anzupassen. Die für wissenschaftliche Untersuchungen erforderliche Offenlegung gelingt jedoch eher mit Open Source Werkzeugen wie OpenFOAM und wirkmächtigen Programmiersprachen wie der Wolfram Language.

Ab der Ebene der Prozessmodellierung (5, PM) ist eine Simulation von komplexen adaptiven Systemen möglich. Die Netzwerkebene (6) wird zur Zeit im Bereich der Systemsimulation (Aspen Technology, Wolfram SystemModeler etc.) erschlossen. Mit Modelica steht dafür eine deklarative Sprache zur Verfügung [39]. Im Chemieingenieurwesen werden grafische Benutzeroberflächen zur Erstellung von Gesamtprozessmodellen verwendet. Diese Systeme basieren auf stark vereinfachten Beschreibungen der Teilsysteme, aus denen dann Modelle bis Ebene (3, ODE) automatisch generiert und gelöst werden.

6 Zusammenfassung

Mit Hilfe der Prozessmodellierung kann die Komplexität von Prozessen beherrscht werden (Abb. 1). Durch die Hinzunahme geeigneter Software-Werkzeuge bricht die wissenschaftliche Weltbeschreibung dann nicht in einer Explosion der Ignoranz [40] zusammen. Es ergibt sich keine Superkomplexität [41], sondern es bleibt bei der zwingenden Notwendigkeit einer der jeweiligen Aufgabenstellung angemessenen Beschreibungsebene [42].

Unterschiedliche Modelle des gleichen Prozesses werden durch einheitliche Ein- und Ausgänge der Modelle vergleichbar. Grundsätzlich ist immer dasjenige Modell vorzuziehen, welches eine vorgege-

bene Problemstellung (definiert über die Modellschnittstelle *Abb. 2*) mit vorgegebener Genauigkeit auf der niedrigsten Komplexitätsebene beschreibt (Ockham's Rasiermesser). Der Ebene der Prozessmodelle (5) kommt dabei eine ähnliche Bedeutung wie den Formeln (1) zu, da es für die Wissenschaftler auf dieser Ebene wieder eine *natürliche* Schnittstelle zu den Modellen gibt, ohne die eine Beherrschung der Komplexität durch den Menschen nicht möglich ist. Die Details der Modellrealisierung können vollkommen verborgen sein. Es ist trotzdem möglich, Prozessmodelle zu qualifizieren und zu falsifizieren. Sie stellen damit eine wichtige wissenschaftlichen Beschreibungsebene dar, ohne die die Zwillingsproblematik von Skalen und Komplexität [42] nicht überwunden werden kann.

Als *wesentliche Gesichtspunkte* der Prozessmodellierung seien hier genannt:

- Prozessmodelle benötigen eine klare Aufgabenstellung und eine offene Schnittstelle [11].
- Eine wichtige Voraussetzung sind wissenschaftlich fundierte Labormessungen.
- Eine zielgerichtete Prozessmodellierung verknüpft Labormessungen, mathematische Modellierung und die Lösung praktisch relevanter Fragestellungen mittels der inversen Modellierung (z.B. *prmc.de* und [14]).
- Sensitivitätsanalysen erlauben eine quantitative Analyse der Prozesse und der Modelle.
- Prozessmodelle liefern im Online-Betrieb nicht messbare Daten oder verbessern die Prozessregelung [23]. Falls nicht gänzlich vermeidbar, so ist die Parametrierung mit Hilfe von Betriebsdaten *mission critical*.
- Prozessmodelle verknüpfen Wissenschaft und Anwendung. Die Auslegung von Anlagen auf der Basis von Prozessmodellen kann die Entwicklung der Hochtemperaturverfahrenstechnik vorantreiben.

Unter dem Aspekt eines nachhaltigen Umganges mit allen Ressourcen ist es zudem eine hoheitliche Aufgabe, die Rahmenbedingungen für die Produktion von Grundstoffen so zu setzen, dass nicht nur deren Preis minimiert wird. Derartige Vorgaben müssen sich primär an den Naturgesetzen orientieren. Prozessmodelle können hier für Mehrzieloptimierungen eingesetzt werden (z.B. [43]) und stellen eine Schlüsseltechnologie dar. Die vorliegende Arbeit³ und [1] sollen dazu dienen, angehenden Prozessmodellierern den Einstieg in die wissenschaftliche Beschäftigung mit einem konkreten Prozess und dessen Modellierung zu erleichtern. Der Aufwand der wissenschaftlichen Prozessmodellierung ist minimierbar, nicht jedoch vermeidbar:

That is what we meant by science. That both question and answer are tied up with uncertainty, and that they are painful. But that there is no way around them. And that you hide nothing; instead, everything is brought out into the open. [Peter Høeg]

Literatur

- [1] J Wendelstorf. *Prozessmodellierung in der Hochtemperaturverfahrenstechnik*. Papierflieger Verlag, zugleich Habilitationsschrift, TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld, Jan. 2016. DOI:10.2 1268/20160212-111545.
- [2] J Wendelstorf. Beiträge der Wissenschaft zur Industrie 4.0!? In *Metallurgisches Kolloquium*, Clausthal-Zellerfeld, 2.-3. November 2016, 2016. doi:10.2 1268/20161102-111057.

³Herrn Dipl.-Ing. G. Hils sei für die kritische Durchsicht des Manuskriptes gedankt.

- [3] R E Kalman. *Topics in mathematical system theory*. McGraw-Hill, NY, 1969.
- [4] R Aris. *Mathematical modelling techniques*. Dover Publ., NY, 1994.
- [5] W Marquardt, H G Bock, B Lohe, and E D Gilles. *Prozeßsimulation*. VCH, Weinheim, 1995.
- [6] R Aris. *Mathematical Modeling – A Chemical Engineer’s Perspective*, volume 1 of *Process Systems Engineering*. Academic Press, San Diego, 1999.
- [7] K M Hantos and I T Cameron. *Process modelling and model analysis*, volume 4 of *Process systems engineering*. Academic Press, San Diego, 2001.
- [8] S Wolfram. *An Elementary Introduction to the Wolfram Language*. Wolfram Media, 2016.
- [9] G M Giaglis. A Taxonomy of Business Process Modeling and Information Systems Modeling Techniques. *International Journal of Flexible Manufacturing Systems*, 13(2):209–228, April 2001. DOI:10.1023/A:1011139719773.
- [10] H J Zimmermann. *Operations Research*. Vieweg, Wiesbaden, 2. edition, 2008.
- [11] J Wendelstorf. Metallurgical Process Modelling. In A Ludwig, editor, *SteelSim 2007*, pages 433–438, Graz/Seggau, Austria, September 12–14,, 2007.
- [12] W Timm, K Weinzierl, A Leipertz, H Zieger, and G Zouhar. Modelling of heat transfer in hot strip mill runout table cooling. *steel research international*, 73:97–104, 2002. DOI:10.1002/srin.200200180.
- [13] F Zhou, K M Wu, C Zhang, O Isayev, and P D Hodgson. Effect of Ultra Fast Cooling on the Alloy Cost Reduction of the X80 Pipeline Steel. *steel research international*, 87(4):511–518, April 2016. DOI:10.1002/srin.201500121.
- [14] J Wendelstorf, K H Spitzer, and R Wendelstorf. Spray Cooling Heat Transfer and Calculation of Water Impact Density for Cooling of Steel Sheet Materials by Inverse Process Modelling. *steel research international*, 80(9):639–644, 2009. DOI:10.2374/SR I09SP054.
- [15] R Viscorova, R Scholz, K H Spitzer, and J Wendelstorf. Spray water cooling heat transfer under oxide scale formation conditions. In B Sundén and C A Brebbia, editors, *Advanced Computational Methods in Heat Transfer IX*, volume 53 of *WIT Transactions on Engineering Sciences*, pages 163–172, Ashurst Lodge, Ashurst, Southampton, UK, 2006. WIT Press. doi:10.2495/HT06 0161.
- [16] R Viscorova, R Scholz, K H Spitzer, and J Wendelstorf. Measurements of spray water cooling heat transfer coefficients under oxide scale formation conditions. In *AISTech 2006, May 1-4, Cleveland Convention Center, Cleveland, Ohio, USA*, volume II, pages 519–528. AIST, 2006.
- [17] R Viscorova. *Untersuchung des Wärmeübergangs bei der Spritzwasserkühlung unter Berücksichtigung des Einflusses der Verzunderung*. PhD thesis, Technische Universität Clausthal, <http://d-nb.info/984878939/34>, Jan. 2007.
- [18] J Wendelstorf, K H Spitzer, and R Wendelstorf. Spray water cooling heat transfer at high temperatures and liquid mass fluxes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(19–20):4902–4910, Sept. 2008. DOI:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2008.01.032.

- [19] R Wendelstorf, K H Spitzer, and J Wendelstorf. Effect of oxide layers on spray water cooling heat transfer at high surface temperatures. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(19-20):4892–4901, Sept. 2008. DOI:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2008.01.033.
- [20] M A Smith and K Weinzierl. Ultra Modern Coiling Temperature Control at Sollac, Lorraine. In *AISTech 2006, May 1-4, 2006, Cleveland Convention Center, Cleveland, Ohio, USA*, pages 827–841. AIST, 2006.
- [21] D D Hall and I Mudawar. Experimental and numerical study of quenching complex-shaped metallic alloys with multiple, overlapping sprays. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38:1201–1216, 1995. DOI: 10.1016/0017-9310(94)00244-P.
- [22] J Wendelstorf. Analysis of the EAF operation by process modelling. *Archives of Metallurgy and Materials (Poland)*, 53(2):385–390, 2008.
- [23] K H Spitzer and J Wendelstorf. A process model for EAF steelmaking. In *AISTech 2006, May 1-4, 2006, Cleveland Convention Center, Cleveland, Ohio, USA*, volume 2 of *Iron & Steel Technology Conference Proceedings*, pages 435–443. AIST, 2006.
- [24] C Ojeda, J C Baumert, M Picco, J C Thibaut, S Sun, S Waterfall, M Ranger, M Lowry, and P Nyssen. Implementation and on-line use of a dynamic process model at the ArcelorMittal-Dofasco Electric Arc Furnace. In *Proceedings STEELSIM 2011*, page Paper 27, Düsseldorf, June 2011.
- [25] M Akdesir. Dynamische Prozessmodellierung des Elektrolichtbogenofens. Diplomarbeit, TU Clausthal, Dez. 2008.
- [26] M Kirschen, V Velikorodov, and H Pfeifer. Mathematical modelling of heat transfer in dedusting plants and comparison to off-gas measurements at electric arc furnaces. *Energy*, 31(14):2926–2939, Nov. 2006. DOI: 10.1016/j.energy.2005.12.006.
- [27] P A Libby and P A Economos. A flame zonemodel for chemical reaction in a laminar boundary layer with application to the injection of hydrogen-oxygen mixtures. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 6(2):113–128, Feb. 1963. DOI: 10.1016/0017-9310(63)90032-2.
- [28] Y B Hahn and H Y Sohn. Mathematical modeling of sulfide flash smelting process: Part I. Model development and verification with laboratory and pilot plant measurements for chalcopyrite concentrate smelting. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 21(6):945–958, Dec. 1990. DOI:10.1007/BF 02670265.
- [29] J Wendelstorf. *Ab initio modelling of thermal plasma gas discharges*. PhD thesis, TU Braunschweig, Dec. 2000. <http://d-nb.info/961148527>.
- [30] J Wendelstorf. Sensitivity Analysis of a Thermo Mechanical Process Model for Shell Formation in Continuous Casting. In *STEELSIM 2011, METEC InSteelCon, 27.06.-01.07.2011*, number (Paper 93), Düsseldorf, June 2011. Stahl-Institut VDEh.
- [31] S Petersen and K Hack. The thermochemistry library ChemApp and its applications. *International journal of materials research*, 98(10):935–945, 2007. DOI:10.3139/14 6.101551.
- [32] R Gani, I Cameron, A Lucia, G Sin, and M Georgiadis. Process Systems Engineering, 2. Modeling and Simulation. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, pages 1–54, 2012. DOI:10.1002/1435 6007.

- [33] C Yilmaz, J Wendelstorf, and T Turek. Modeling and simulation of hydrogen injection into a blast furnace to reduce carbon dioxide emissions. *Journal of Cleaner Production*, 154:488–501, June 2017. DOI :10.1016/j.jclepro.2017.03.162.
- [34] H Lambrecht and B Jung. Die Atmosphäre der Fixsterne. *Naturwissenschaften*, 24(37):577–582, 1936. DOI:10.1007/BF 01474452.
- [35] F Bezzo, S Macchietto, and C C Pantelides. A general framework for the integration of computational fluid dynamics and process simulation. *Computers & Chemical Engineering*, 24(2-7):653–658, 2000. DOI :10.1016/S0098-1354(00)00372-0.
- [36] F Bezzo, S Macchietto, and C C Pantelides. A general methodology for hybrid multizonal/CFD models - Part I. Theoretical framework. *Computers & Chemical Engineering*, 28(4):501–511, 2004. DOI:10.1016/j.compchemeng.2003.08.004.
- [37] R P Feynman. Cargo Cult Science. *Engineering and Science*, 37(7):10–13, June 1974.
- [38] J R Wilson. Conduct, Misconduct, And Cargo Cult Science. In S Andradóttir, K J Healy, D H Withers, and B L Nelson, editors, *Proceedings of the 1997 Winter Simulation Conference*, pages 1405–1413, 1997. doi:10.1145 /268437.268790.
- [39] P Fritzson. *Introduction to modeling and simulation of technical and physical systems with Modelica*. Wiley, 2011.
- [40] J Lukaszewicz. *The Ignorance Explosion: Understanding Industrial Civilization*. Carleton University Press, 1994.
- [41] R Barnett. *Realizing the university in an age of supercomplexity*. Society for Research into Higher Education & Open University Press, 2000.
- [42] P W Anderson. More is different: broken symmetry and the nature of the hierarchical structure of science. *Science*, 177(4047):393–396, Aug. 1972. DOI: 10.1126/science.177.4047.393.
- [43] E Malfa, P Nyssen, E Filippini, B Dettmer, I Unamuno, A Gustafsson, E Sandberg, and B Kleimt. Cost and Energy Effective Management of EAF with Flexible Charge Material Mix. *Berg- und Hüttenmännische Monatshefte (BHM)*, 158(1):3–12, 2013. DOI:10. 1007/s00501-012-0103-y.